



TITLE:

# 二成分 Lennard-Jones 系における 衝撃波管シミュレーション(複雑流 体の数理とシミュレーション)

AUTHOR(S):

湯川, 諭; 伊藤, 伸泰

---

CITATION:

湯川, 諭 ...[et al]. 二成分 Lennard-Jones 系における衝撃波管シミュレーション(複雑流体の数理とシミュレーション). 数理解析研究所講究録 2007, 1539: 120-130

ISSUE DATE:

2007-02

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/59062>

RIGHT:

## 二成分 Lennard-Jones 系における 衝撃波管シミュレーション

大阪大学大学院理学研究科宇宙地球科学専攻

湯川 諭 (Satoshi Yukawa)\*、

Department of Earth and Space Science, Graduate School of Science,

Osaka University

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻

伊藤 伸泰 (Nobuyasu Ito)

Department of Applied Physics, School of Engineering,

The University of Tokyo

### 概要

ブルカノ式噴火のような極端な非平衡条件下での速い相分離ダイナミクスを調べるため、二成分 Lennard-Jones 粒子系を用いて、相分離系のモデル化をおこなった。極端非平衡条件は、高温で高圧、高密度な熱平衡状態を急減圧するという操作で実現する。これは衝撃波管実験とそのまま対応するため、コンピュータ上で衝撃波管の状況を構成し、シミュレーションを行った。その結果、衝撃波管実験で観測される様々な波動の伝播が再現されるとともに、非常にきれいな相分離ダイナミクスが実現できた。またこの系の理論解析に要請される条件を幾つか調べた。

### 1 はじめに

非平衡統計力学と連続体理論の関係で、近年議論されている問題が、「局所平衡仮定の破れがどの程度あるか、もしあるとするならば、それは現象にどのように反映されるか」というこ

とである。それらの問題を検討するためには、微視的なスケールでモデル化を行い、そのモデルを使って連続体記述が有効な状況をシミュレートすることが非常に有効である。

そのような研究の結果、局所平衡性はきわめて強ちに成立していることがわかってきた。円柱周りを過ぎる流れのような、定常な流れの場合は局所平衡性が強ちに成立しているのは当然のような気もするが、[9] 非平衡境界条件により、温度勾配の存在などの熱力学的な非平衡状態を作ったとしても、非平衡定常状態ならば局所平衡を仮定した連続体理論の予言にきわめてよく一致する。[14]

そこで次に気になるのが、非平衡非定常状態はどうであるかということである。ここでは、そのような観点で非平衡非定常条件下でのミクロシミュレーションを行った研究の成果を報告する。現在のところ、非平衡熱力学・統計力学に何か言えるところまでは行っていないが、シミュレーションによる結果が非常に興味深いので、その部分だけでも何か役に立つことがあるかと思う。

\*yukawa@ess.sci.osaka-u.ac.jp

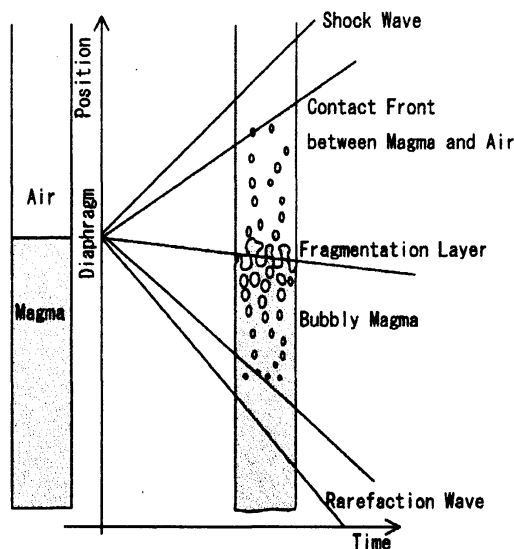


図 1: Schematic picture of Vulcanian dynamics.

## 2 モデルとその背景

非平衡非定常状態をミクロなモデルのシミュレーションから攻めるとは言ってもただ闇雲にしても意味はない。ここでは、非平衡非定常ダイナミクスとして火山噴火における火道内のマグマ-ガス二成分系のダイナミクスを取り扱うことにする。

火山噴火の様々な様式の中でもブルカノ式噴火とは、日本では桜島の噴火に見られるような火山爆発であり、比較的シリカ成分の多い高粘性のマグマが関与する。一般に火山噴火に対してはマグマだけではなく、マグマ内部に溶けている揮発性のガスが重要な役割を担う。[2] このガスはほぼ水であり、マグマに対して数質量%含まれていることが知られている。

ブルカノ式噴火における噴火のダイナミクスは次のようなものであるといわれている。ブルカノ式噴火を示す火山では、マグマが高粘性であるため噴火前には火口の上に溶岩ドームが形成されている。噴火は、何らかの原因で火道内のマグマ-ガス系の圧力が上昇し、この溶岩ドームを破壊した瞬間から起こる。通常、マグマ-ガス系は地殻圧に支えられガス(水)が飽和している状態でマグマ溜まりにある。この状態で溶岩ドームの破壊に伴う減圧が発生すると、

飽和溶解度の限界を超えガスが過飽和になる。するとガス成分の核生成が発生し、マグマ中にガスの気泡が成長する。気泡を含んだマグマ-ガス系は、密度が軽くなり上昇を始める。この上昇に伴い、圧力が低下しさらに気泡が成長する。気泡の成長が臨界値を越えると、気泡が浸透しマグマ-ガス系はマグマ気泡流から、マグマの噴霧流へと遷移する。このような状態の変化が瞬間的に起こるのが、ブルカノ式噴火である。時間的な変化が急であること、状態の変化が劇的であることが理論的な解析を難しくしている一因である。この急激な相分離を伴うダイナミクスが、研究対象である非平衡非定常条件下でのダイナミクスと合致する。

このような状況を実験室系で再現するために、火山学では衝撃波管実験をつかって、ブルカノ式噴火のアナログ実験が行われてきた。[5, 3, 4] そこでは、マグマに見立てた粘弾性体や粉体などといったアナログ物質を高温高圧でチューブに閉じこめ、隔壁をはずしたあとの爆発的振る舞いを観測するということが行われている。これらの状況に対応する連続体記述による理論モデルもいくつか提唱され、解析もなされているが、マグマ-ガス二成分系の状態方程式を非常に単純化したモデルで決めるなど理論の正当性などはまだまだ明らかでない。[6, 7, 8]

本研究では、そのような衝撃波管の状況におけるマグマ-ガス二成分系のダイナミクスをミクロな観点からモデル化し、コンピューターシミュレーションをおこなった。

### 2.1 モデル

ミクロなモデル化とは言ってもいろいろありうるが、ここでは分子動力学法を使うことにする。つまりマグマ-ガスの二成分系を離散的な粒子をつかって表現し、粒子間の相互作用を決め、あとはニュートンの運動方程式に従って運動するという単純なモデルを採用する。このようなニュートン方程式に従って運動する粒子系において、さまざまな流体の振る舞いが再現されることが知られており、連続体の記述の検証にも用いることができる。[9]

具体的な構成粒子間の相互作用として、ここでは Lennard-Jones 型のポテンシャルを採用する。Lennard-Jones 型のポテンシャルを用いることにより、気相、液相、固相、またそれらの共存など、マグマダイナミクスに必要な相は全て再現することができる。また、平衡系の性質がよく知られているので、パラメータを選ぶときに無駄なシミュレーションを省くことができる。マグマとガスの物性の違いは、Lennard-Jones 粒子のパラメータを変更することで表現する。今のモデル化では質量と相互作用をマグマ粒子、ガス粒子で変更することにより物性の違いを表現している。実際の系のダイナミクスを支配する 3 次元  $N$  粒子系のハミルトニアンとして次のような物を使用する。

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j(i \neq j)} \alpha_i \alpha_j \phi(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|), \quad (1)$$

$\phi(r)$  は Lennard-Jones 12-6 ポテンシャルであり、

$$\phi(r) = 4\epsilon \left\{ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\}, \quad (2)$$

と書かれる。また、各粒子の質量  $m_i$  としてマグマは  $m_{\text{magma}} = 1$ 、ガスは  $m_{\text{gas}} = 0.1$  を取ることとする。さらにエネルギーの次元  $\epsilon$ 、長さの次元  $\sigma$  をともに 1 に取ることとし、これらで全ての次元を無次元化する。また、Boltzmann 定数  $k_B$  を 1 と取ること、温度とエネルギーは同じ単位で測ることとする。これより数密度の単位が  $\text{個}/\sigma^3$ 、時間の単位が  $\sigma\sqrt{m_{\text{magma}}}/\epsilon$ 、圧力の単位が  $\epsilon/\sigma^3$  などと決まる。

相互作用の前の係数  $\alpha_i$  は、マグマとガスに対して相互作用を変えるためであり、マグマに対しては 1 を、ガスに対しては 0.1 を取ることとする。これでマグマ間の相互作用はガス間の相互作用に対して 100 倍強く働くことになる。この相互作用の係数比は、マグマの融点と水の融点の比を表していると考えことができ、実際のマグマと水とは少しずれるが、今のシミュレーションではこれで十分である。 $\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i$  は、粒子の三次元での運動量、座標を表す。

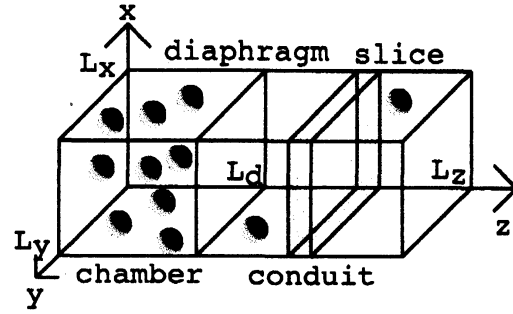


図 2: Geometry of the system. When we calculate physical quantities, we slice the system with a unit length.

### 3 シミュレーション

シミュレーションに際しては衝撃波管の実験を念頭におこなう。系の形状として直方体の箱 ( $L_x \times L_y \times L_z$ ,  $L_i$  はそれぞれの方向の長さ) を考える。マグマは  $z$  軸正の方向に爆発することにする。 $x, y$  方向は周期的境界条件を課し、 $z$  軸方向の境界条件として、両端に弾性反射壁をおいておく場合と、 $z$  軸爆発方向の壁に対して、ある程度以上の運動エネルギーを持って入射してきた粒子を吸収する粒子吸収壁を設けてある場合二通りをとった。(図 2) 弾性壁をつける場合、Lennard-Jones ポテンシャルの底から見た斥力部分で壁のポテンシャルを表現している。初期状態として、系を「マグマ溜まり」部分と、「火道」部分の二つに弾性壁で分け、マグマ溜まり部分に、マグマ粒子とガス粒子、火道部分にガス粒子を入れておく。それぞれで能勢-Hoover 熱浴を使って等温の熱平衡状態を準備する。[10, 11, 12] 例えば、マグマ溜まりにある粒子に対して運動方程式は、次のように変更される。

$$\dot{\mathbf{q}}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}_i} \quad (3)$$

$$\dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}_i} - \zeta \mathbf{p}_i \quad (4)$$

$$\dot{\zeta} = \frac{1}{\tau} \left( \sum_{i \in A} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} - \frac{3}{2} N_A T_A \right) \quad (5)$$

ここで、 $\sum_{i \in A}$  はマグマ溜まりに入っている粒子に対して和を取ることを表しており、 $N_A, T_A$

はマグマ溜まりの粒子数、マグマ溜まりの温度を表す。また、 $\tau$ は温度制御の時定数であり正のパラメーターである。 $\zeta$ が熱浴の効果を現しており、制御したい部分の全運動エネルギーが、設定したい温度で決まる運動エネルギーに収束するように、一種の「摩擦」で運動量を変化させる。この運動方程式を用いて平衡状態に十分緩和したあと、マグマ溜まりと火道を仕切っている弾性壁を取り除く。これが衝撃波管の実験での隔壁に穴を開けた瞬間に対応する。これ以降は熱浴的作用を取り除き、系の時間発展はニュートン方程式に従って時間発展させる。

初期にマグマ溜まりの温度を比較的高温に保ち、密度も高密度で準備し、火道内のガスの温度、密度を適当に小さく設定しておけば、マグマ溜まりと火道の隔壁を取り除くと、自発的に爆発が発生する。

## 4 結果

### 4.1 物理量の時空プロファイル

シミュレーションの典型的な結果を示す。全ての物理量がマイクロな量で定義されるので、密度場や圧力場、温度場など連続体との検証に必要な物は全て計算することができる。それぞれの物理量は、系を $z$ 軸方向に輪切りにした厚み1のスライスの中で計算している。例えば、数密度場 $n(z)$ 、質量密度場 $\rho(z)$ 、応力場 $\Pi_{\alpha\beta}(z)$ などは次のように定義されている。

$$\begin{aligned} n(z) &= \frac{\sum_{i \in z} 1}{L_x L_y} \\ \rho(z) &= \frac{\sum_{i \in z} m_i}{L_x L_y} \\ \Pi_{\alpha\beta}(z) &= \frac{1}{L_x L_y} \sum_{i \in z} \frac{(\mathbf{p}_i)_\alpha (\mathbf{p}_i)_\beta}{m_i} \\ &\quad + \frac{1}{2L_x L_y} \sum_{i \in z \text{ or } j \in z} f_\alpha^{ij} q_\beta^{ij} \\ &\quad - (\mathbf{v}(z))_\alpha (\mathbf{v}(z))_\beta \rho(z) \end{aligned}$$

$z$ は一つのスライスを指定するインデックスである。和 $\sum_{i \in z}$ はスライス $z$ にふくまれる粒子

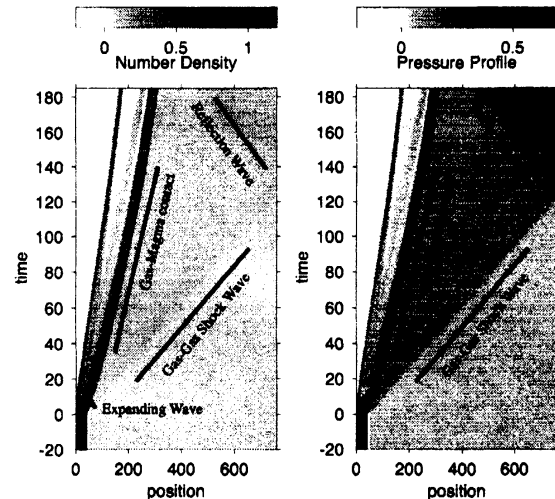


図 3: Space-time profile of number density (left) and local pressure (right): Horizontal axis represents coordinate of explosion direction ( $z$  axis) and vertical axis is time. At time 0, a diaphragm is removed. Characteristic waves are guided by lines.

で和を取ることを表している。応力場の定義で $\alpha, \beta$ は $x, y, z$ のいずれかを取り、 $(\mathbf{p}_i)_\alpha$ は粒子 $i$ の運動量の $\alpha$ 成分を表す。また、 $f_\alpha^{ij}$ は、粒子 $i$ と $j$ の間に働く力の $\alpha$ 成分であり、 $q_\beta^{ij}$ はそれらの粒子の相対座標の $\beta$ 成分を表す。第二項の和は、粒子 $i$ もしくは $j$ が考えているスライスの中に入っているときに和を取り、二つの粒子が同時に入っているときは二重に数える。第三項で $\mathbf{v}(z)$ はスライス $z$ での重心速度であり、

$$\mathbf{v}(z) = \frac{\sum_{i \in z} \mathbf{p}_i}{\sum_{i \in z} m_i} \quad (6)$$

として定義される。

応力テンソル場が定義できたので、圧力場 $p(z)$ を通常やるように応力テンソルのトレースの空間次元分の1で定義する。

$$p(z) = \frac{1}{3} \sum_{\alpha} \Pi_{\alpha\alpha}(z) \quad (7)$$

図 3 は、局所的な数密度場と圧力場のプロファイルである。系の大きさは $L_x = 40, L_y = 40, L_z = 752$ であり、粒子数は、マグマ 57600 粒子、ガス 118400 粒子である。横軸は $z$ 軸方

向の座標。縦軸は時刻である。時刻0で爆発しその後の時間発展が示されている。爆発は左から右に起こる。 $z$ 軸方向の境界条件は、弾性壁を両側につけている。また、初期のマグマ溜まりの大きさは $40 \times 40 \times 40$ である。初期状態ではマグマ溜まりにマグマ 57600 粒子と、ガス 6400 粒子をつめ、温度 2 で熱平衡化させている。また火道部分  $40 \times 40 \times 704$  にガス 112000 粒子をつめ温度 0.8 で熱平衡化させてある。直方体を $z$ 軸方向に厚み 1 で輪切りにし、そのスライスの中で局所的な物理量を計算した。

数密度場において、 $z$ 座標が正の向きに進行している衝撃波が二つ見られる。初めの速度の速い物は、ガスの音速を超えておりこれは噴火によるガスとガスの間の衝撃波である。このような衝撃波は実際の火山噴火の際にも観測されている。また、それより遅れてもうひとつ高密度領域と低密度領域を分ける波が伝播しているのが観測される。この波は、マグマとガスの間の接触面である。さらに、爆発後、時刻 120 当たりから、 $z$ 軸負の方向に向かって右の弾性壁から衝撃波が走っているのが見られる。これは、 $z$ 軸の上の境界条件である弾性壁からの反射波なので、これ以降の計算は上部の境界の影響が出ている。また時刻 20 ぐらいから、左の弾性壁からもう一つ密度波が出ていることがわかる。この密度波は、膨張波が、マグマ溜まりの底の弾性壁に当たって跳ね返ってきた分に対応している。さらに、時刻 40 ぐらいから、密度場においてマグマ-ガス接触面より後方で内部構造が成長して行くのが観測される。これは詳細なスナップショットの解析から、マグマ内部のガスが発泡しながら爆発していく様子であることがわかり、火山学で言われている発泡しながら爆発するという状況が再現できている。この内部構造の様子は、次の小節で詳しく見る。さらに、圧力場ではわからないが、数密度場のプロファイルにおいて、爆発直後から $z$ 軸負の向きに、別の波が伝わっている様子が見られる。これは、減圧が伝わっている波であり、膨張波であると見なすことができる。

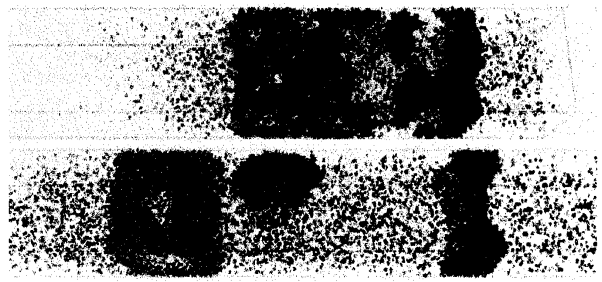


図 4: (Color on a web page[16]) Snapshots of simulation: (Up) Snapshot at  $t = 40$ . (Down) Snapshot at  $t = 170$ . Parameters are identical to ones of Fig. 3. Eruption propagates to the left direction. Only particles originated from the chamber are plotted; A darker ball represents a magma particle, and brighter one is a gas particle. At the initial condition  $t = 0$ , magma and gas particles are uniformly mixed in the chamber.

## 4.2 内部構造

前小節で、物理量の時空プロファイルにおいて、噴火しているマグマに内部構造が成長していく様子が見られた。ここでは、この内部構造を詳しく見てみよう。噴火後、爆発後  $t = 40$  での粒子のスナップショットと  $t = 170$  のものを図 4 に示しておいた。図で横方向が $z$ 軸方向であり、噴火は右向きに起こる。初期状態では、一様に混ざっていたマグマ粒子(濃い色の粒子)とガス粒子(薄い色の粒子)が、噴火後  $t = 40$  では、ガス粒子が析出することにより相分離を起こしていることがわかる。また、このとき生成しているガスの気泡の大きさがそれほど均一ではなく、様々なサイズに分布していることも見てわかる。

このあともう少し時間がたつと ( $t = 170$ )、様々なサイズに分布していた気泡が成長、合体し、比較的大きな気泡になっていることがわかる。また、成長した大きな気泡の内部にマグマの液滴が存在していることもわかる。さらに、マグマ内部にもすこし気泡が存在していることも見て取れる。このように、時空間のプロットで内部構造が成長しているように見えたところでは、実際に粒子分布を見れば、内部構造が存

在し、且つその構造が成長していく様子も観測される。この振る舞いは、火山学での噴火のシナリオで噴霧流遷移が起きるということに対応しているが、この図を描いた計算規模では、遷移と言いきれるほどの気泡数、液滴数は無い。

### 4.3 連続体モデルとの比較

火山学の方でブルカノ式噴火に対する連続体のモデルがいくつかある。その中でも衝撃波管の連続体の記述をそのまま火山噴火に応用した Woods (1995) のモデルが解析的にも取り扱いやすい。[6] ここでは、Woods のモデルとシミュレーション結果の比較を行う。Woods のモデルは、基本的に一次元の成分圧縮性流体の方程式であり、以下のような支配方程式で記述される。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + w \frac{\partial \rho}{\partial z} = -\rho \frac{\partial w}{\partial z} \quad (8)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p_g}{\partial z} \quad (9)$$

$$\frac{1-n}{\rho_l} + \frac{nRT}{p_g} = \frac{1}{\rho} \quad (10)$$

$$p_g \left( \frac{\phi}{\rho} \right)^{\gamma_m} = \text{const.} \quad (11)$$

ここで初めの二つが一般的な質量保存の式と運動方程式であり、時空間の座標は  $t, z$  に取っている。 $t$  が時間、 $z$  が噴火方向の座標である。 $\rho$  がマグマ-ガスを合わせた質量密度、 $w$  が流体の速度場である。また、 $p_g$  がガス成分の圧力であり、Woods のモデルではマグマの圧力と等しいとされる。三つ目の式が、マグマ-ガスの状態方程式であり、 $n$  がガス成分の質量分率を表す。 $\rho_l$  がマグマの質量密度であり、 $R$  は気体定数、 $T$  が温度である。Woods のモデル化では質量分率  $n$  が一定であると仮定し、マグマ質量密度  $\rho_l$  も不変であるとみなす。このとき、ガス成分が理想気体的に振る舞うと仮定すれば、この状態方程式でマグマ-ガスの状態を記述できる。最後の4番目の式が、等エントロピー性を仮定して導かれた式であり、理想気体の等エントロピー流れの解析で出てくる物と類似して

いる。(例えば [13]。) $\phi$  は、ガス成分の体積分率を表し、状態方程式から

$$\phi = \frac{\frac{nRT}{p_g}}{\frac{nRT}{p_g} + \frac{1-n}{\rho_l}} = \frac{1}{1 + \frac{1-n}{n} \frac{p_g}{\rho_l RT}} \quad (12)$$

と表現できる。また、 $\gamma_m$  は、定圧比熱と定積比熱の比であり、今の仮定の下では局所的な状態を決めると決まる。方程式の変数をまとめておくと、場の変数は  $\rho, w, p_g, T$  であり、これら以外の量は定数か、これらから計算できる物である。これで変数の数と方程式の数が一致するので、ダイナミクスが計算できることになる。

この支配方程式から見てわかるとおり、Woods のモデルではマグマに溶けているガスが析出してくる効果は全くふくまれていない。このため、マグマからガスが析出し核生成を行う噴火の初期段階の記述は不完全であると思われる。また、ガスの気泡の体積が大きくなってきて全系に浸透しきった状態への転移後のダイナミクスの記述も難しいであろう。ただ元々が圧縮性流体の方程式であるため、シミュレーションや実際の観測で見つかっている衝撃波を定性的に記述することが可能であると思われる。実際、この方程式は理想気体の一次元圧縮性流体の記述と構造が同じ為、次のような方程式へと変形できる。

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + (w \pm a(\rho)) \frac{\partial}{\partial z} \right\} \times \left( w \pm \int^{\rho} \frac{a(\rho')}{\rho'} d\rho' \right) = 0 \quad (13)$$

ここで、 $a(\rho)$  はマグマ-ガス系の音速であり、 $a^2(\rho) = \gamma_m p_g / (\rho \phi)$  という関係がある。これと、等エントロピーの条件を連立させると、音速は密度の関数として一意に求めることができる。この方程式の形から明らかなように、 $w \pm a$  の速度で移動する観測者から見て  $w \pm \int^{\rho} \frac{a(\rho')}{\rho'} d\rho'$  が保存量であり、これらから膨張波の速度などが議論できる。また、適当な境界条件を組み合わせることにより、衝撃波の速度、膨張波内部の状態なども議論することができる。

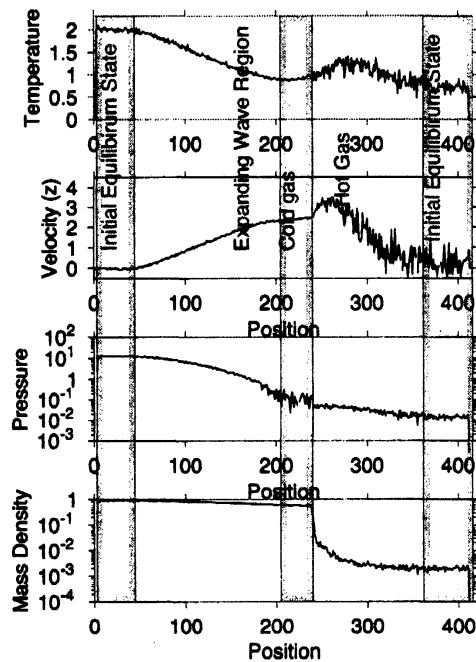


図 5: Spatial profiles of temperature, velocity ( $z$ ), pressure, and mass density at  $t = 15$ : System size is taken to be  $L_x = 32, L_y = 32, L_z = 408$  and size of magma chamber is  $32 \times 32 \times 200$ . Initial mass density and temperature are taken to be 1 and 2, respectively. We can recognize characteristic regions. From right, “initial equilibrium state”, “hot gas region”, “cold gas region”, “expanding wave region”, and “initial equilibrium state” again are observed. These regions are indicated by gray rectangular.

Woods のモデルで計算できる物理量と対応するものを図 5 に示しておいた。上から順に温度  $T(z)$ 、爆発方向の速度  $(v(z))_z$ 、圧力場  $p(z)$ 、質量密度  $\rho(z)$  である。温度の定義は、重心速度

$$v(z) = \frac{\sum_{i \in z} p_i}{\sum_{i \in z} m_i} \quad (14)$$

からの速度分散

$$T(z) = \frac{1}{3} \frac{1}{\sum_{i \in z} 1} \sum_{i \in z} m_i |v_i - v(z)|^2 \quad (15)$$

として定義した。一般にマグマとガスの温度がそれぞれで違う可能性があるが、この定義ではいっさい考慮していない。

またこの図は、系の大きさが  $L_x = L_y = 32, L_z = 408$  の計算結果であり、初期マグマ溜まりの大きさは  $32 \times 32 \times 200$  である。この中に、数密度 1 でマグマ粒子とガス粒子が入っており、そのうちの 10% がガス粒子である。平衡状態の温度は先の計算と同じである。また、この計算では爆発方向の  $z$  軸の境界条件は、粒子吸収壁をおいている。

図 5 には膨張波の波頭がマグマ溜まりの底に到達する前の時刻  $t = 15$  での物理量のプロファイルを表示した。横軸は、噴火方向の座標  $z$  であり、 $z = 200$  までが初期のマグマ溜まりの領域である。火道は  $z = 408$  まで続いている。初期に準備した平衡状態での温度が、マグマ溜まり  $T = 2$ 、火道  $T = 0.8$  であることと、図の温度プロファイルから、膨張波の波頭が到達していないところと、衝撃波の波面が到達していないところがはっきりとわかる。これらの領域を図では、「Initial Equilibrium State」として表示してある。また、時空間のプロットから、位置 240 程度の所に、マグマとガスの接触面があることがわかっている。これは、質量密度のプロファイルからもはっきりと読み取れる。このマグマ-ガス接触面と膨張波の波尾までが、冷気体に対応する領域であり、物理量のプロファイルでは、温度が低温で一定のところ、また速度が比較的高速で一定のところとして観測される。この領域を「cold gas」として表示してある。これを見ると膨張波の波尾が、ちょうど火



道とマグマ溜まりの境にあることがわかり、流速が音速と等しいことを意味している。そこから、膨張波の波頭までの間が膨張波が存在しているところであり、温度や速度、圧力、密度になめらかな変化が見られる。さらに、マグマ-ガス接触面と前方の初期状態のままでいる領域の間は、ガスの衝撃波が通り抜けたあとの高温に加熱されている部分であり、温度や、速度は主としてガス粒子が担っていることが読み取れる。速度のプロファイルで、マグマ-ガス接触面直前に比較的高速になっている部分があるが、これが実際にガス粒子が加速されている領域で、熱化する前の状態に対応している。

この計算結果を定性的に連続体モデルの結果と比較してみよう。連続体モデルは理想気体の圧縮流体モデルであるから、既にわかっている衝撃波管の解析を流用することができる。その解析によれば上のような図を書いたとき、プロファイルは5つの領域に分かれることが知られている。衝撃波が伝わる下流側から見れば、(1) 初期の低温平衡状態が保たれている領域、(2) 衝撃波面が通ったあとの低温状態にいたガスが加熱された高温領域 (熱気体の領域)、(3) 高温状態にいたガスが断熱膨張で冷却された領域 (冷気体の領域)、(4) 膨張波が存在する領域、(5) 初期の高温平衡状態にある領域、である。シミュレーションの結果をこの領域分割と比較すると、全ての領域が完全に再現されていることがわかり定性的に良い一致を見せている。

また連続体記述と異なることもある。理想気体の場合は一般に (4) の領域をのぞくと、残り四つの領域で物理量は一定であるが、シミュレーションでは領域 (2) においてそうはなっていない。これは、衝撃波面の通過による加熱のミクロなダイナミクスを反映していると考えられる。

#### 4.4 大規模シミュレーション

内部構造をみたときに、マグマ液滴や気泡の大きさのスケールが系の断面の大きさとほぼ同じであることが確かめられた。この結果から系の断面の一辺の長さをあと数倍すれば

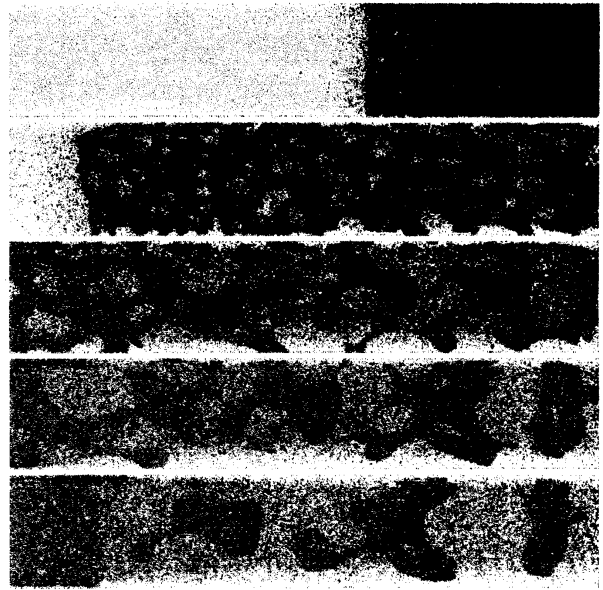


図 6: (Color on a web page[16]) Snapshots of large simulation: (top) Snapshot at  $t = 40$ . (second) Snapshot at  $t = 170$ . (third) Snapshot at  $t = 300$ . (forth) Snapshot at  $t = 400$ . (bottom) Snapshot at  $t = 500$ . Eruption propagates to the left direction. A darker ball represents a magma particle, and brighter one is a gas particle. At the initial condition  $t = 0$ , magma and gas particles are uniformly mixed in the chamber.

気泡流から噴霧流への転移が再現できることが期待できる。ここではそれをふまえて大規模化した計算結果を示す。図 6 は、系の大きさ  $L_x = L_y = 120, L_z = 864$  の結果であり、マグマ粒子が 3110400 個、ガス粒子が 794880 個入っている。初期のマグマ溜まりの大きさは 240 である。また、温度や密度の条件は今まで通りである。この計算では、爆発方向の境界条件は粒子吸収壁であり、反射波の影響が無いようにしている。これをみると、ガスの気泡流から噴霧流への転移が観測されている。 $t = 300$  付近が気泡流-噴霧流転移に対応する時間領域である。また、噴霧流に転移したあとでも、気泡の成長や、マグマ液滴の構造の変化などが見られる。

この規模の計算ではマグマのクラスター解析なども可能になり、噴霧流転移後からマグマクラスターの数が増えることや、クラスターサ

イズ分布がべき分布になっていることなどがわかっていてる。

#### 4.5 断面でみた物理量の解析

極限状況下での、二成分 Lennard-Jones 粒子系における相分離ダイナミクスを連続体モデルで解析するために、シミュレーション結果から連続体記述に対する制限を調べておこう。そのために、大規模計算の結果を爆発方向と平行な断面で切り、その平面で物理量を計算した。結果を図 7 に示す。図では、左がマグマ成分、右がガス成分である。白黒で少しわかりにくいですが、相分離を記述するオーダーパラメーターである数密度は、マグマ成分とガス成分できっちりと分かれているのが確認できる。また、温度をマグマ成分、ガス成分に分けてプロットした結果から、マグマ成分とガス成分で温度が異なっていることがわかる。これは、非平衡非定常状態の反映でありこのような速い相分離ダイナミクスでは、熱伝導が追いつかず、温度不均一性が形成されることがあることがわかった。これは重大な知見であり、通常考えられているような温度が一樣な連続体モデルでの解析では不十分なことを示唆している。また、速度場を見ると、マグマ成分、ガス成分ともにほぼ同じような振る舞いをしていることから、速度場に関しては、一次元の圧縮性流体による衝撃波管解析の解のような流れを仮定しても問題ないように思われる。

### 5 まとめ

極端非平衡条件下での非平衡物理の観点から、火山噴火のダイナミクスを実際の現象の例にとり、二成分 Lennard-Jones 粒子系でモデル化を行った。そのような微視的なモデルをシミュレーションにより解析すると連続体で記述されるような振る舞いが再現されるだけではなく、極端条件下での速い相分離ダイナミクスとして、分離した相の温度が違うなど、新たな現象が発見された。このような相分離ダイナミク

スを記述するためには、従来型の連続体モデルでは無く、いわゆる H-モデルを局所温度を含むように改良したようなモデルが必要であろうと思われるが、この解析はまだ行っていない。  
[15]

また、二成分 Lennard-Jones 系の大規模シミュレーションと言う観点から見ると、今の結果のようにきわめてはつきりと気泡流から噴霧流への転移を再現した例はなく、大変興味深い。さらにマイクロシミュレーションから再現されたセミマクロなマグマクラスターのダイナミクスにも、通常のクラスター凝集過程で見られるような成長過程やサイズ分布の特徴があり、今後このような観点からも解析を行いたい。

火山噴火現象のモデルとしてみると、現在のモデルは Lennard-Jones 相互作用を用いたことから低粘性のように振る舞っている。圧縮性流体の解析と、それなりに一致したのはこの低粘性の振る舞いが効いているからである。実際のマグマでは粘性が高く、また散逸の入った連続体理論の解析からも、低粘性の挙動とは少し違うことが報告されているので、高粘性を再現するマイクロモデルの構築が不可欠である。その際には、高粘性だけではなく粘弾性の効果も取り込まなければならない。

### 謝辞

この研究は文部科学省特定領域研究「火山爆発のダイナミクス」の補助を受けています。改めて感謝します。

### 参考文献

- [1] 特定領域研究「火山爆発のダイナミクス」研究集会、「2004 年、火山爆発夏の学校」テキスト。
- [2] 鍵山恒臣編、東京大学地震研究所編集、地球科学の新展開 3 「マグマダイナミクスと火山噴火」朝倉書房、2003 年。
- [3] M. Ichihara, D. Rittel, and B. Sturtevant: "Fragmentation of a porous viscoelastic

- material: Implications to magma fragmentation", *J. Geophys. Res.* **107**(B10), 2229, doi:10.1029/2001JB000591, (2002).
- [4] O. Spieler, D. B. Dingwell, and M. Alidibirov: "Magma fragmentation speed: an experimental determination", *J. Volcanol. Geotherm. Res.* **129**, 109-123, (2004).
- [5] B. Cagnoli, A. Barmin, O. Melnik, R. S. J. Sparks: "Depressurization of fine powders in a shock tube and dynamics of fragmented magma in volcanic conduits", *Earth Planet. Sci. Lett.* **204**, 101-113, (2002).
- [6] A. W. Woods: "A model of vulcanian explosions", *Nucl. Eng. Design*, **155**, 345-357, (1995).
- [7] O. Melnik: "Dynamics of two-phase conduit flow of high-viscosity gas-saturated magma: large variations of sustained explosive eruption intensity", *Bull. Volcanol.* **62**, 153-170, (2000).
- [8] O. Melnik and R. S. J. Sparks: "Nonlinear dynamics of lava dome extrusion", *Nature* **402**, 37-41, (1999).
- [9] T. Ishiwata, T. Murakami, S. Yukawa, and N. Ito: "Particle Dynamics Simulations of the Navier-Stokes Flow with Hard Disks", *Int. J. Mod. Phys. C* **15**, 1413-1424, (2004).
- [10] S. Nosé: "A molecular-dynamics method for simulations in the canonical ensemble", *Mol. Phys.* **52**, 255, (1984).
- [11] S. Nosé: "A unified formulation of the constant temperature molecular-dynamics methods", *J. Chem. Phys.* **81**, 511, (1984).
- [12] W. G. Hoover: "Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions", *Phys. Rev.* **A31**, 1695, (1985).
- [13] 松尾一泰「圧縮性流体力学」理工学社、1994年。
- [14] T. Murakami, T. Shimada, S. Yukawa, and N. Ito: "Energy Transport in Multiphase System", *Journal of the Physical Society of Japan* **72**, 1049-1056, (2003).
- [15] P. C. Hohenberg and B. I. Halperin: "Theory of dynamic critical phenomena", *Rev. Mod. Phys.* **49**, 436-479, (1977).
- [16] この原稿のカラー版を web ページに期間限定で掲示しておく。カラーで図を見たい人や、動画を見たい人はアクセスしてほしい。 <http://bopper.ess.sci.osaka-u.ac.jp/~yuk/volcano/>

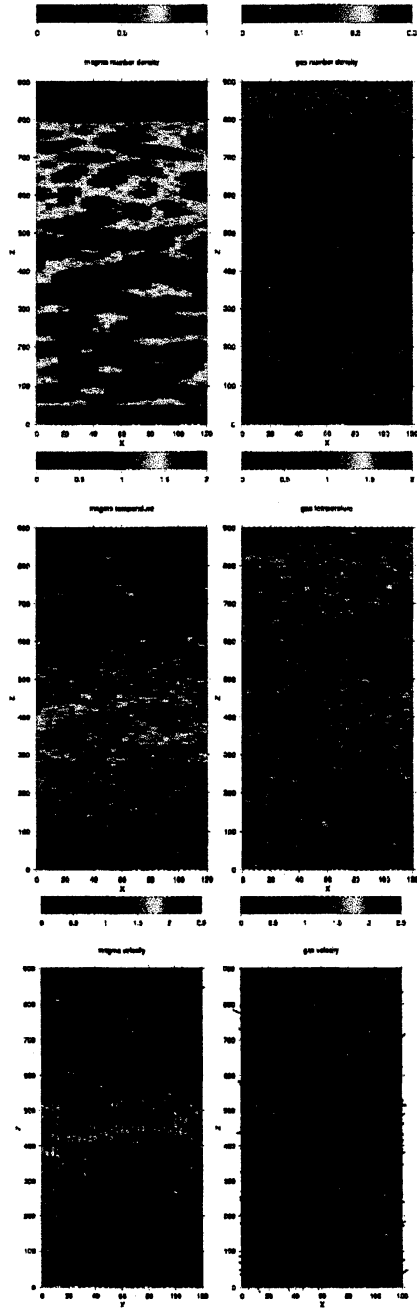


FIG 7: (Color on a web page[16]) Snapshots of physical quantities on  $xz$  plane at  $t = 210$ : (top) Number density profile. (second) Temperature profile. (bottom) Velocity field profile. A left view is of magma component and a right view is of gas component.